

sahebsara@cc.iut.ac.ir :

(دریافت مقاله: ۱۳۹۰/۱۲/۱۴؛ دریافت نسخه نهایی: ۱۳۹۱/۷/۱۱)

$$0 \leq x \leq 0.5$$

s

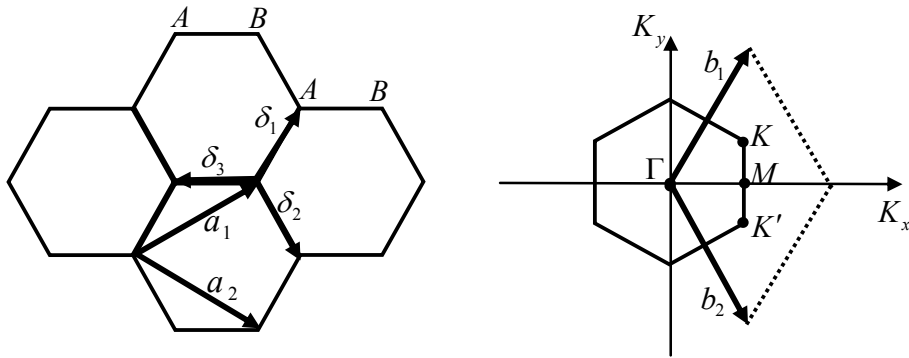
$$x = 0.25$$

شدگی به خود اختصاص داده است [۲-۵].

روش‌های نظری مختلف، برای جستجوی نظم ابرسانایی در این مواد منجر به نتایج مختلفی شده است. از جمله روش مونت کارلوی تعمیم یافته ابرسانایی نوع  $d$  [۶] و تقریب خوشه‌ای وردشی ابرسانایی نوع  $p$  [۷] را در گرافین پیش‌بینی کرده‌اند. سایر روش‌های دیگر نیز انواع دیگری از ابرسانایی، حتی ترکیبی از جفت شدگی‌ها، را پیشنهاد کرده‌اند [۸-۱۰]. همچنین نشان داده شده است که می‌توان ابرسانایی را بر اثر مجاورت در گرافین القا کرد [۱۱ تا ۱۳].

پیش‌بینی می‌شود با کاهش مقدار برهم‌کنش تا زیر یک مقدار بحرانی، دمای بحرانی ابرسانایی در این مواد در غیاب آلاینش به صفر نزدیک شود و گاف غیر صفر تنها برای حد جفت‌شدگی‌های قوی امکان‌پذیر باشد [۱۴-۱۶]. فرض جفت‌شدگی کوپر در گرافین آلاینش نشده با مشکلاتی مواجه

کشف ابرسانایی دمای بالا در اکسیدهای فلزی پایه مس موجب شد مطالعه بر روی ابرسانایی در سیستم‌های الکترونی با همبستگی قوی مورد توجه قرار گیرد. ساز و کارهای ابرسانایی دمای بالا که در آنها فونون‌ها نقش واسطه را ایفا نمی‌کنند، برای مدت زیادی مورد بررسی قرار گرفتند و وجود آنها به‌عنوان یک موضوع بحث برانگیز باقی مانده است [۱]. یکی از پیشنهادات مهم در مورد ابرسانایی دمای بالا، که در آن برهم‌کنش الکترون‌ها در سیستم همبسته قوی عامل ایجاد زوج کوپر است، اخیراً توسط اندرسون بیان شد [۱ و ۲]. پس از تولید گرافین در سال ۲۰۰۴ و شناسایی ویژگی‌های منحصر به فرد آن، این ماده به طور قابل توجهی مورد مطالعه قرار گرفت. احتمال ظهور ابرسانایی در گرافین خالص و گرافین آلاینش، مطالعات نظری قابل توجهی را در مورد انواع مختلف جفت



شکل ۱. شبکه لانه زنبوری و ناحیه بریلوئن. سمت راست: ناحیه بریلوئن متناظر با شبکه لانه زنبوری.  $b_1$  و  $b_2$  بردارهای شبکه وارون هستند و مخروط‌های دیراک در نقاط  $k$  و  $k'$  قرار گرفته‌اند. سمت چپ: ساختار شبکه لانه زنبوری که از دو زیر شبکه مثلثی درهم تشکیل شده است.

نزدیک‌ترین جایگاه مجاور،  $U$  پتانسیل برهم‌کنش کولنی بین الکترون‌های با اسپین مخالف درون یک جایگاه است و عملگر  $A_{i\sigma}^\dagger (B_{j\sigma}^\dagger)$  یک الکترون با اسپین  $\sigma$  در جایگاه  $i$  ( $j$ ) خلق می‌کند. از آنجایی که تغییرات ویژگی‌های مدل بر حسب تغییرات تعداد الکترون‌ها مورد نظر است، جمله پتانسیل شیمیایی  $\mu$ ، را در هامیلتونی وارد می‌کنیم.

شبکه لانه زنبوری دوبخشی است و از دو زیر شبکه مثلثی  $A$  و  $B$  تشکیل شده است (شکل ۱). اتم‌های زیر شبکه‌های  $A$  و  $B$  از نظر موقعیت مکانی با یکدیگر متفاوتند، بنابراین شبکه برآه یک شبکه لانه زنبوری، یک شبکه مثلثی با پایه دو اتمی است.

بردارهای  $a_1$  و  $a_2$  بردارهای شبکه هستند و بردارهای  $\delta_i$  بردار نزدیک‌ترین همسایگان هستند. بردارهای شبکه، با بردارهای  $a_1$  و  $a_2$  به صورت زیر نشان داده می‌شوند:

$$a_1 = \frac{a}{\sqrt{3}}(1, \sqrt{3}), \tag{2}$$

که در آن  $a$  پارامتر شبکه (فاصله اتم-کربن - کربن) و برابر با  $1.42 \text{ \AA}$  می‌باشد. شبکه وارون یک شبکه لانه زنبوری نیز یک شبکه شش گوشه است و بردارهای شبکه وارون، بردارهای  $b_1$  و  $b_2$  هستند:

$$b_1 = \frac{\sqrt{3}}{2a}(1, \sqrt{3}), \tag{3}$$

$$b_2 = \frac{\sqrt{3}}{2a}(1, -\sqrt{3}).$$

در فضای حقیقی هر اتم  $A$  دارای سه همسایه مرتبه اول از نوع  $B$  می‌باشد و بردار نزدیک‌ترین همسایگان با  $\delta_i$  نمایش داده می‌شود:

می‌شود، زیرا سطح فرمی در نزدیکی نقاط دیراک کوچک شده و تعداد حالت‌ها در انرژی فرمی به صفر می‌رسند. در واقع در مدل BCS نشان داده شده است که گذار ابررسانایی در گرافین آلاینش نشده در برهم‌کنش ضعیف، منجر به یک نقطه کوانتومی بحرانی در دمای بحرانی صفر می‌شود [۱۴-۱۶].

در این مقاله، با استفاده از مدل هابارد که در بررسی سیستم‌های همبسته قوی مورد استفاده قرار می‌گیرد، به مطالعه احتمال وجود ابررسانایی متقارن نوع  $s$  در شبکه لانه زنبوری می‌پردازیم. بر مبنای این نظریه، در سیستم‌های همبسته قوی، برخلاف نظریه BCS و نظریه‌های مشابه، برهم‌کنش مثبت قوی بین الکترون‌ها ( $U > 0$ ) عامل به دست آوردن ابررسانایی تلقی می‌شود [۱ و ۱۷-۲۰]. بنابراین با استفاده از مدل هابارد و با استفاده از تقریب میدان میانگین، فازهای شکست تقارن محاسبه می‌شوند.

با استفاده از نظریه BCS استاندارد و در نظر گرفتن برهم‌کنش جفت‌شدگی نوع  $s$  می‌توانیم ظهور ابررسانایی در شبکه لانه زنبوری را بررسی نماییم. بنابراین ابتدا مدل هابارد در شبکه هگزاگونال دو بعدی را به صورت زیر تعریف می‌کنیم:

$$H = - \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} (t_{ij} A_{i\sigma}^\dagger B_{j\sigma} + H.c.) + U \sum_{i \in A, B} n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} - \mu \sum_{i \in A, B} \sum_{\sigma} n_{i\sigma}, \tag{1}$$

که در این رابطه  $t$  انرژی پرش الکترون از یک جایگاه به

$$\left(F^{\uparrow\downarrow}(r, r', t)\right)^\dagger = \left(F_{ab}^{\uparrow\downarrow}(t)\right)^\dagger = -i \left\langle TB_{j\sigma}^\dagger(0); A_{i\sigma}^\dagger(t) \right\rangle.$$

در این صورت می توان چگالی حالت ها را به شکل زیر تعریف نمود [۲۱]:

$$n_e = -iG(r, r, -0) = -\frac{i}{2\pi} \left[ \int_{-\infty}^{\infty} dE e^{-iEt} G(r, r, E) \right]_{t \rightarrow 0^-} \quad (11)$$

به همین ترتیب می توان پارامتر نظم ابرسانایی را به صورت زیر به دست آورد:

$$\Delta = -i \left( F^\dagger(r, r, +0) \right)^* = -\frac{i}{2\pi} \left[ \int_{-\infty}^{\infty} dE e^{iEt} \left( F^\dagger(r, r, E) \right)^* \right]_{t \rightarrow 0^+} \quad (12)$$

در محاسبات انجام شده، ابتدا عملگرها در نمایش هایزبرگ نوشته می شوند و سپس با استفاده از معادلات حرکت در نمایش هایزبرگ، معادلات حرکت جفت شده به دست می آیند. این معادلات حرکت جفت شده مربوط به توابع گرین  $F$  و  $G$  بر روی دو سایت مجاور و یا - با برابر قرار دادن مکان- بر روی یک سایت می باشند. برای به دست آوردن مؤلفه های ماتریس تابع گرین، این معادلات جفت شده باید به طور همزمان حل شوند. در نهایت برای به دست آوردن چگالی حالت ها و پارامتر نظم ابرسانایی تنها به مؤلفه هایی که بر روی یک سایت هستند نیاز داریم. این مؤلفه ها به صورت زیر به دست می آیند:

$$G_{aa}(E) = -\frac{(E - \mu)(\Delta^\dagger - E^\dagger + \mu^\dagger) + (E + \mu)|t|^\dagger}{(E^\dagger - \alpha^\dagger)(E^\dagger - \beta^\dagger)}, \quad (13)$$

$$F_{aa}^\dagger(E) = \frac{\Delta(\Delta^\dagger - E^\dagger + \mu^\dagger + t_{ij}^\dagger)}{(E^\dagger - \alpha^\dagger)(E^\dagger - \beta^\dagger)}.$$

که در آنها  $\alpha$  و  $\beta$  قطب های تابع گرین و ویژه مقادیر انرژی هامیلتونی میدان میانگین هستند، که به این صورت تعریف شده اند:

$$\alpha \equiv \sqrt{\Delta^\dagger + (\mu + t)^\dagger}, \quad (14)$$

$$\beta \equiv \sqrt{\Delta^\dagger + (\mu - t)^\dagger}.$$

با جایگزین کردن  $G_{aa}$  و  $F_{aa}^\dagger$  در روابط (۱۱) و (۱۲)، دو معادله خودسازگار جفت شده برای پارامتر نظم ابرسانایی و چگالی الکترون ها به دست می آید. بدین منظور ابتدا لازم است

$$\delta_\downarrow = \frac{a}{\gamma} (1, \sqrt{3}),$$

$$\delta_\uparrow = \frac{a}{\gamma} (1, -\sqrt{3}), \quad (4)$$

$$\delta_\uparrow = -a(1, 0).$$

در حالی که همسایگان مرتبه دوم  $A(B)$  از نوع  $A(B)$  بوده و با  $\delta'_i$  نمایش داده می شود:

$$\delta'_1 = \pm a_1,$$

$$\delta'_2 = \pm a_2, \quad (5)$$

$$\delta'_3 = \pm (a_2 - a_1).$$

در یک حالت شکست تقارن نظم ابرسانایی نوع  $s$  توسط مقدار میانگین دو عملگر خلق (یا فنا) با اسپین مخالف ( $\sigma \neq \sigma'$ ) در جایگاه نوع  $A(B)$  تعریف می شود:

$$\Delta_{ij}^i \equiv \sigma U \langle A_{i\sigma}; A_{i\sigma'} \rangle = \sigma U \langle B_{j\sigma}; B_{j\sigma'} \rangle, \quad (6)$$

برای وارد کردن پارامتر نظم ابرسانایی، هامیلتونی در تقریب میدان میانگین به شکل زیر بازنویسی می شود:

$$H = \sum_k \phi_k^\dagger M \phi_k, \quad (7)$$

که در آن از جمله حاصلضرب دو میدان میانگین  $\left( \sum_i |\Delta_{ij}^i|^\dagger \right)$

چشم پوشی شده است. در رابطه (۷)،  $\phi_k^\dagger$  به صورت:

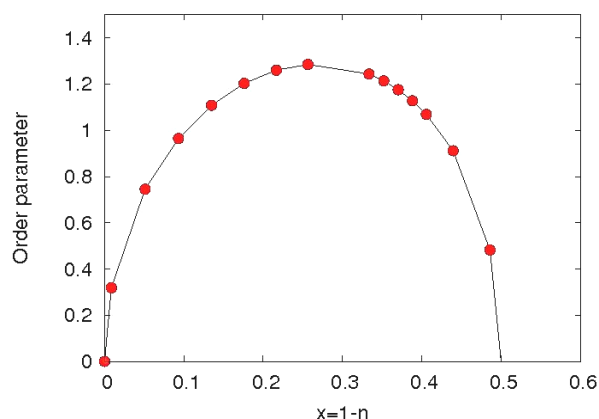
$$\phi_k^\dagger = \left( A_{i\uparrow}^\dagger B_{j\uparrow}^\dagger A_{i\downarrow}^\dagger B_{j\downarrow}^\dagger \right), \quad (8)$$

تعریف می شود. اگر پارامتر نظم حقیقی در نظر گرفته شود، ماتریس  $M_k$  به صورت زیر نوشته خواهد شد:

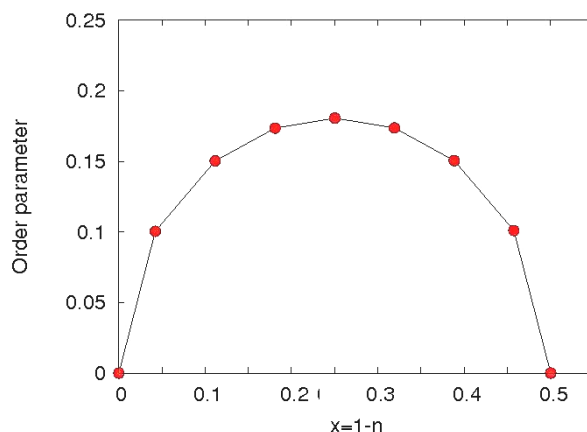
$$M_k = \begin{pmatrix} -\mu & -t_{ij} & -\Delta & 0 \\ -t_{ji} & -\mu & 0 & -\Delta \\ -\Delta & 0 & \mu & t_{ji} \\ 0 & -\Delta & t_{ij} & \mu \end{pmatrix} \quad (9)$$

هدف بررسی هامیلتونی رابطه (۹) با روش تابع گرین است. همان طور که مشخص است، هامیلتونی و بنابراین تابع گرین در اینجا ماتریس های  $4 \times 4$  هستند. حال توابع گرین  $F$  و  $G$  را به صورت زیر معرفی می کنیم:

$$G(r, r', t) = G_{ab}^\sigma(t) = -i \left\langle TA_{i\sigma}(t); B_{j\sigma}^\dagger(0) \right\rangle, \quad (10)$$



شکل ۳. نمودار پارامتر نظم برای شبکه لانه زنبوری برحسب آرایش برای  $U/t=6$ .



شکل ۲. نمودار پارامتر نظم برای شبکه لانه زنبوری برحسب آرایش برای  $U/t=1$ .

در شکل‌های ۲ و ۳ نمودار پارامتر نظم ابررسانایی برحسب آرایش رسم شده است. محاسبات در دمای صفر انجام شده است. بررسی پارامتر نظم، که در اینجا به صورت گاف ابررسانایی تعریف می‌شود، معیار مناسبی از جفت‌شدگی الکترون‌ها و بنابراین قدرت ابررسانایی می‌باشد. همان‌طور که در شکل دیده می‌شود، احتمال ظهور ابررسانایی در بازه  $0 \leq x \leq 0.5$  وجود دارد. با مقایسه شکل ۲ و شکل ۳ درمی‌یابیم که با افزایش  $U$  پارامتر نظم ابررسانایی و در نتیجه احتمال ظهور ابررسانایی افزایش می‌یابد. در هر دو شکل در  $x=0.25$  پارامتر نظم بیشترین مقدار خود را خواهد داشت، بنابراین احتمال ظهور ابررسانایی در آن بیشتر است. به عبارت دیگر  $x=0.25$  آرایش بهینه برای ابررسانایی نوع  $s$  در شبکه لانه زنبوری است.

به طور خلاصه، محاسبات انجام شده در این تحقیق، با استفاده از روش تقریب میدان میانگین بر روی سیستم‌های همبسته قوی، که در آن برهم‌کنش دافعه بین الکترون‌ها بزرگ در نظر گرفته می‌شود، نشانگر احتمال وجود ابررسانایی نوع  $s$  در شبکه لانه زنبوری است. این محاسبات احتمال وجود انواع دیگر ابررسانایی را نفی نمی‌کند. علاوه بر این ممکن است فازهای منظم مغناطیسی دیگر مانند نظم امواج چگالی اسپینی یا حتی امواج چگالی بار در این ناحیه به طور همزمان با فاز

$G_{aa}$  و  $F_{aa}^\dagger$  بر حسب قطب‌های تابع گرین بسط داده شوند. توابع گرین  $F$  و  $G$  در همه جا به جز برای  $E = \pm\alpha$  و  $E = \pm\beta$  خوش تعریف هستند. برای به دست آوردن مقادیر این توابع در نقاط تکینه، پارامتر مثبت بسیار کوچک  $\varepsilon$  در مخرج توابع وارد می‌شود و سپس با استفاده از تابع پله‌ای:

$$\theta(t-t') = -\frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dE \frac{e^{-iE(t-t')}}{E+i\varepsilon}, \quad (15)$$

می‌توان این روابط را به شکل ساده‌ای بازنویسی کرد. حل روابط فوق منجر به معادلات زیر برای پارامتر نظم و چگالی الکترون‌ها می‌شود:

$$\Delta = \frac{U}{4} \left( \frac{\Delta}{\alpha} + \frac{\Delta}{\beta} \right), \quad (16)$$

$$n = \gamma_1 + \gamma_2.$$

که در آن پارامترهای  $\gamma_1$  و  $\gamma_2$  به صورت زیر خواهند بود:

$$\gamma_1 = \frac{(\alpha + \mu)(\Delta^2 - \alpha^2 + \mu^2) + (\alpha - \mu)|t|^2}{2\alpha(\beta - \alpha)(\beta + \alpha)},$$

$$\gamma_2 = \frac{(\beta + \mu)(\Delta^2 - \beta^2 + \mu^2) + (\beta - \mu)|t|^2}{2\beta(\alpha - \beta)(\alpha + \beta)}. \quad (17)$$

رشته معادلات (۱۶) به صورت عددی حل شدند و برای نسبت‌های مختلف  $U/t$  نمودارهای پارامتر نظم برحسب آرایش در شکل ۲ برای  $U/t=1$  و در شکل ۳ برای  $U/t=6$  به دست آمد.

موضوع کارهای دیگری است که در گروه در حال انجام است و بخش دیگر آن می تواند در آینده مورد بررسی قرار گیرد.

ابرسانایی وجود داشته باشند. در این صورت برای به دست آوردن فاز غالب در حالت پایه سیستم، نظمی که منجر به کمینه شدن انرژی شود مد نظر خواهد بود. بخشی از این مطلب

- Communications* **143** (2007) 72.
12. A Shailos, *Europhysics Letters* **79** (2007) 57008.
  13. Y Jiang, D X Yao, E W Carlson, H D Chen, and J P Hu, *Phys. Rev. B* **77** (2008) 235420.
  14. E C Marino and H C M NunesLizardo, *Nucl. Phys. B* **741**(2006) 404.
  15. E C Marino and H C M NunesLizardo, *Nucl. Phys. B* **769** (2007) 275.
  16. E C Marino and H C M NunesLizardo, *Physica C* **460** (2007) 1101.
  17. P W Anderson, *Science* **235** (1987) 1196.
  18. D Sénéchal, P-LLavertu, M-A Marois, and A-M S Tremblay, *Phys. Rev. Lett.* **94** (2005) 156404.
  19. B Kyung, D Sénéchal, and A-M S Tremblay, *Phys. Rev. B* **80** (2009) 205109.
  20. A-M S Tremblay, B Kyung, and D Sénéchal, *Low Temp. Phys.* **32** (2006) 424.
  21. A S Alexandrov, "Theory of superconductivity from weak to strong coupling", Loughborough University, UK (2003).
  1. P W Anderson, "The theory of superconductivity in the high- $T_c$  cuprate superconductors", Princeton University Press (1997).
  2. B Uchoa and A Castro Neto, *Phys. Rev. Lett.* **98** (2007) 146801.
  3. S Pisana, *Nature materials* **6** (2007) 198.
  4. J Gonzalez and EPerfetto, *Phys. Rev. B* **76** (2007) 155404.
  5. H Mousavi, *Phys. Lett. A* **374** (2010) 2953.
  6. S Pathak, V B Shenoy, and GBaskaran, *Phys. Rev. B* **81** (2010) 85431.
  7. P Sahebsara and D Sénéchal, *Arxiv:0908.0474*.
  8. H B Heersche, P Jarillo-Herrero, J B Oostinga, L M K Vandersypen, and A F Morpurgo, *Nature* **446** (2007) 56.
  9. Y Jiang, D Yao, E W Carlson, H Chen, and J Hu, *Phys. Rev. B* **77** (2008) 235420.
  10. J González, F Guinea, and M A H Vozmediano, *Phys. Rev. B* **63** (2001) 134421.
  11. H B Heersche, PJarillo-Herrero, J B Oostinga, L M K Vandersypen, and AFMorpurgo, *Solid State*